Universität Ulm
Abteilung Theoretische Chemie

Prof. Dr. Axel Groß
Christian Carbogno

Grundpraktikum Theoretische Chemie

Übungsblatt 2, 06.05.2008

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von
`http://www.uni-ulm.de/theochem/`

Problem 2: Monte Carlo Verfahren
Das Polynom

$$P(x) = 6x^2 + 10x + 2 \tag{1}$$

sei gegeben. Schreiben Sie ein FORTRAN Programm, das das bestimmte Integral über dies Polynom als eine Summe über die Werte des Polynoms an zufällig gewählten gleichverteilten Stützpunkten berechnet:

$$\int_a^b P(x)dx \approx \frac{b-a}{N} \sum_i P(x_i) \ , \tag{2}$$

wobei die x_i gleichverteilte Zufallszahlen im Intervall $[a, b]$ sind und N die Anzahl der Stützpunkte ist. Vergleichen Sie das Resultat als Funktion von N mit dem exakten Resultat.

Hinweis:
Ein Unterprogramm zur Erzeugung von Zufallszahlen kann von der Webpage des Praktikums bei
`http://www.uni-ulm.de/theochem/lehre/SS2008/de.PraktikumTheoChemSS2008.html`
heruntergeladen werden.